

### 「京」・「富岳」

常行 真司 Shinji Tsuneyuki

東京大学/HPCI コンソーシアム 理事  
「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括



元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>が始まる少し前に、「京」のアプリ開発と分野振興を図るプロジェクト「HPCI戦略プログラム」の中で、物性研、分子研、金研を中心として計算物質科学イニシアティブ(CMSI)が設立された。CMSIでは研究のパートナーとして元素戦略各拠点のメンバーとなる方々との繋がりをつくるイベントを開催し、これにより実験(計測)-計算連携の礎が築かれ、CMSIのメンバーも各拠点に組み込まれて、実験と計算が一体となった元素戦略研究拠点が提案された。

以来、CMSIやその後継プロジェクトである「ポスト「京」重点課題」

が元素戦略プロジェクトと連携する中で、材料研究者のニーズに応える形で、「京」や「富岳」を利用するための大規模計算技術や、材料研究に役立つ基盤的なアプリの開発が進展した。「京」ではこれまでにない大規模計算が可能になり、材料らしい複雑な界面や化学反応などの第一原理計算が行われるようになった。また「富岳」では大規模計算に加え、データ科学的手法により大量の計算データを活用する研究スタイル、いわゆるマテリアルズインフォマティクスが急速に進展しつつある。

一方、開発されたアプリは、計算物質科学ポータルサイトMateriApps

や初心者向けのパッケージ化されたソフトウェア環境MateriApps Live、また多数のアプリ講習会を通じて、その普及が進められた。この動きは、国の予算を投入して開発されたアプリの活用という観点で意味があつただけでなく、アプリがより多くのユーザに使われ、ユーザニーズのフィードバックを受けて改良され、その結果としてアプリ開発者が評価されるという、ポジティブフィードバックをもたらすものであり、計算物質科学振興につながったと考える。これらの活動は、プロジェクト終了後も物性研を中心とする計算物質科学コミュニティにより継続される予定である。

The screenshot shows the MateriApps website interface. At the top, there is a header with the site's name and a search bar. Below the header, there are several sections: a 'Category' section with various software categories like '電子状態計算' (Electronic Structure Calculation), '分子動力学' (Molecular Dynamics), and 'データベース' (Database); a 'App Ranking' section showing the top apps in the Crystallography category; and a 'NEWS / 講習会・イベント' section with a link to 'MateriApps LIVE!'. The overall design is clean and modern, with a green and white color scheme.

#### 関連 WEB

HPCI 広報サイト 富岳百景 <https://fugaku100kei.jp/>  
物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps <https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/>